



TITLE:

# 長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析

AUTHOR(S):

上田, 純平

---

CITATION:

上田, 純平. 長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 60-60

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230760>

RIGHT:

長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析  
Analysis of electron trap level in persistent phosphors

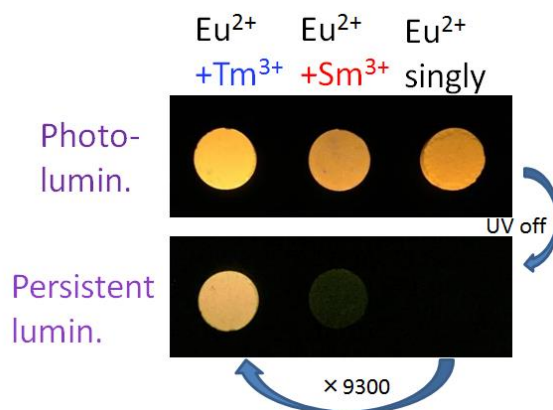
京都大学 人間・環境学研究科 関連環境学専攻

上田 純平

研究成果概要

長残光蛍光体とは、励起光を遮断後も、数時間から十数時間という長い時間発光し続ける発光材料であり、夜光塗料として時計の文字盤や避難誘導標識に使用されている。現在、市場に出回っている長残光蛍光体の 8 割は、1993 年に根本特殊化学株式会社によって開発された  $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}\text{-Dy}^{3+}$  である。この長残光蛍光体をブレークスルーに、様々な長残光蛍光体がトライアンドエラーにより、研究開発がされてきたが、開発から約 20 年以上たった現在でも  $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}\text{-Dy}^{3+}$  が最大輝度、最長時間を示す残光蛍光体である。長残光蛍光体の設計には、発光中心イオン、ホスト伝導帯、欠陥トラップ準位のエネルギー位置関係が重要であり、スペクトロスコープによりこれらのエネルギー準位の決定&予測を行ってきた。本研究では、量子計算ソフトによるバンド構造計算により、長残光蛍光体の機構の理解を深めることを目的としている。

今回、 $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7:\text{Eu}^{2+}$  橙色蛍光体において、長残光特性を付加させるために、真空基準束縛エネルギー準位図を構築し、最適電子トラップ中心が  $\text{Tm}^{3+}$  と  $\text{Sm}^{3+}$  であると予測した。実際に、 $\text{Tm}^{3+}$  を  $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7:\text{Eu}^{2+}$  蛍光体に共添加することで、その残光強度は 9300 倍も向上した。CASTEP を用いた、バンド構造計算により、 $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7$  の伝導帯下端は、主に Ca の 4s 軌道により形成され、励起光によって  $\text{Eu}^{2+}$  の電子がこの伝導帯を介して  $\text{Tm}^{3+}$  へ移動していることを明らかにした。



**Figure 1.** Images of photoluminescence and persistent luminescence in  $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7$  doped with  $\text{Eu}^{2+}$ ,  $\text{Eu}^{2+}\text{-Sm}^{3+}$  and  $\text{Eu}^{2+}\text{-Tm}^{3+}$ .

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

- [1] J. Ueda, R. Maki, and S. Tanabe, *inorg. chem.* 56, 10353 (2017).